CAS SciFinder®

CAS SCIFINDER DISCOVERY PLATFORM FOR ACADEMICS™ 紹介 セミナー

化学情報協会　情報事業部

CAS
A division of the American Chemical Society

Contents

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS SciFinder Discovery Platform for Academics の概要

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS SciFinder Discovery Platform for Academicsとは

教育研究機関を対象にした研究活動を総合的にサポートするサービス

CAS SciFinder Discovery Platform for Academics に含まれるサービス

- **CAS SciFinder**
  文献、化学物質、反応情報、物性、規制情報検索サービス
- **CAS Analytical Methods**
  分析手法の調査に特化した検索サービス
- **CAS Formulus**
  製剤・配合情報に特化した検索サービス

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS SciFinder Discovery Platform for Academicsとは

教育研究機関を対象にした研究活動を総合的にサポートするサービス

CAS SciFinder Discovery Platform から追加されたコンテンツ（青字）

CAS SciFinder

- **ChemZent**
  最古の化学情報誌
- **CAS Bioactivity Data**
  ライフサイエンス分野の強化

⟷ **CAS Analytical Methods**
分析手法検索ツール

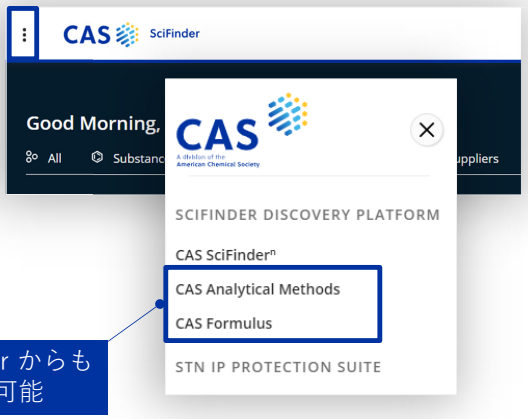
相互にリンク

⟷ **CAS Formulus**
世界最大の製剤・配合情報検索ツール

アクセス方法

Username (ID)、パスワードはすべて CAS SciFinder と共通

製品名	接続先 URL
CAS SciFinder	https://scifinder-n.cas.org/
CAS Analytical Methods	https://methods.cas.org/
CAS Formulus	https://formulus.cas.org/



CAS SciFinder からも
アクセス可能

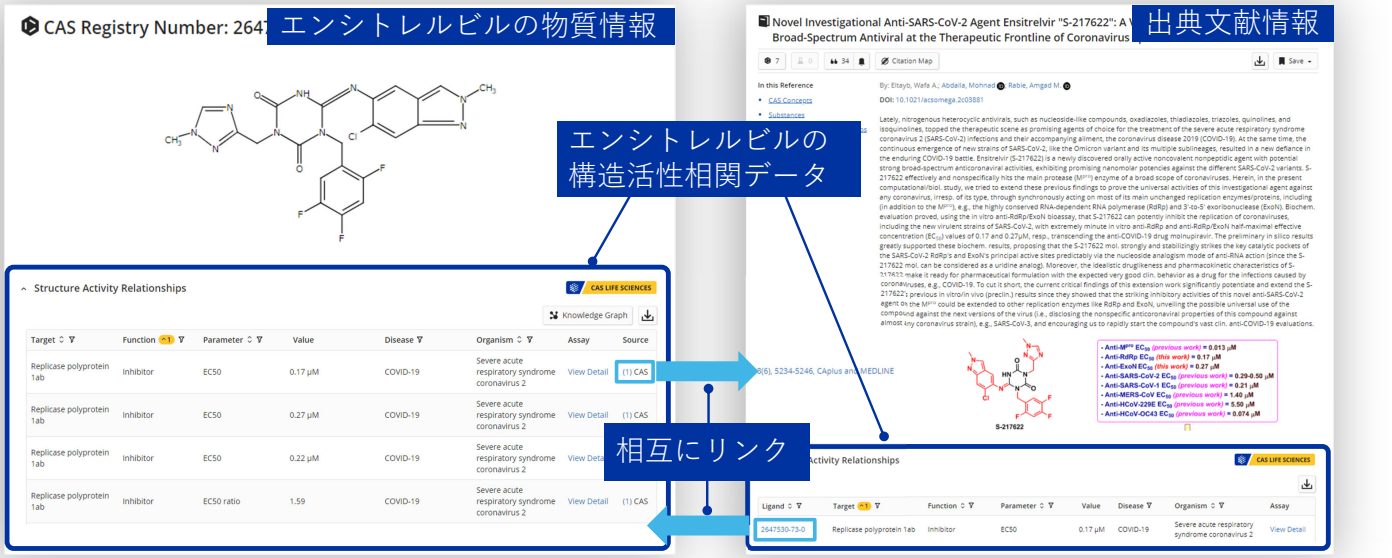
CAS SciFinder のライフサイエンスコンテンツ

CAS SciFinder のライフサイエンスコンテンツ

- **MEDLINE**
  生物医学分野の文献データベース (PubMed の情報)
  CAS SciFinder の References で検索できる
- **CAS Sequences**
  8 億件以上の核酸・タンパク質の配列情報を収録
  3 つのホモロジー検索プログラム (BLAST/CDR/Motif) を登載
- **CAS Bioactivity Data**
  SAR (構造活性相関)、ADME (吸収、分布、代謝、排泄)、Toxicity (毒性) 情報
  ターゲットやリガンド、疾患を指定した検索

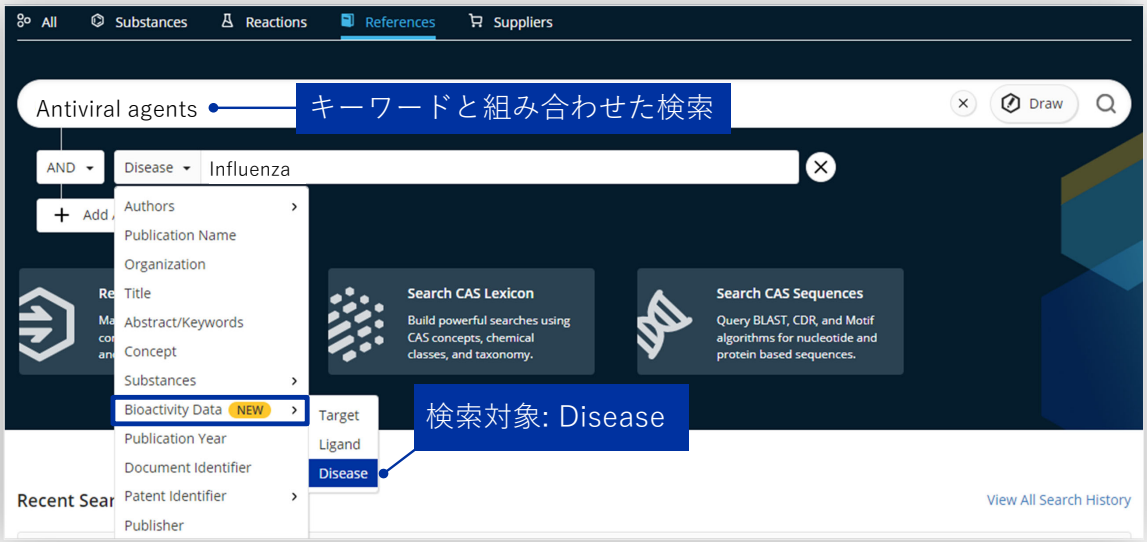
CAS Bioactivity Data

物質の生物活性情報と出典文献情報を紐づけて収録



デモンストレーション

インフルエンザウイルスに対する生物活性情報を文献から検索する



CAS Analytical Methods

CAS Analytical Methods

多岐にわたる分野の分析手法を効率的に検索

収録分野：

- 薬理学、HPLC 分析、食品分析、天然物単離分析、水分析など

収録内容：

- 測定機器、手順、バリデーションデータを含む詳細な分析情報

CAS が保有する文献コレクションから、
分析の情報を抽出し、項目ごとに整理してデータベース化

CAS Analytical Methods

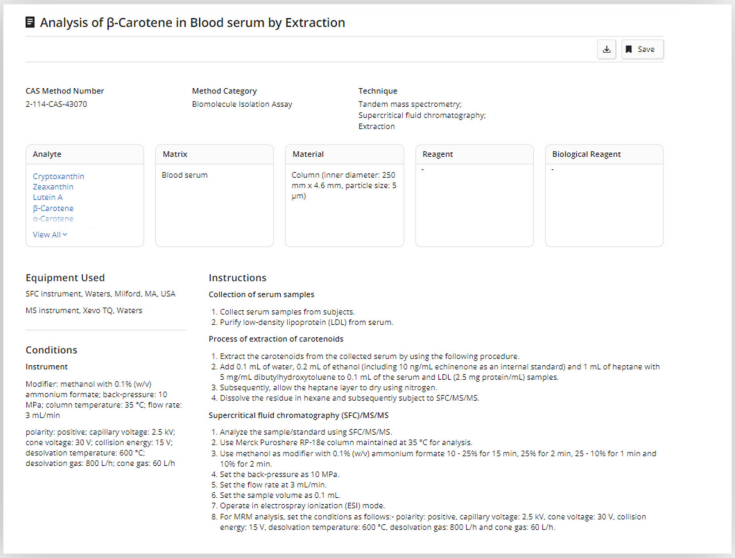
収録範囲

項目	内容
収録源	CAS SciFinder に収録の雑誌論文 例: Journal of Natural Medicines, Journal of Chromatography A, B, Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, Talanta, Analytica Chimica Acta
収録分野	医薬、農学、化学を中心とした科学分野
レコード構成	分析手法単位
収録期間	2000 年～

CAS Analytical Methods

レコード例

- タイトル
- 物質情報
- 分析カテゴリー
分析手法名
- 使用機器、条件
- 分析手順
- バリデーション
（妥当性の検証結果）
- 収録源
（雑誌名，著者名、
出典のタイトル、抄録など）



Analysis of β-Carotene in Blood serum by Extraction

Save

CAS Method Number
2-114-CAS-43070

Method Category
Biomolecule Isolation Assay

Technique
Tandem mass spectrometry;
Supercritical fluid chromatography;
Extraction

Analyte	Matrix	Material	Reagent	Biological Reagent
Cryptoxanthin Zeaxanthin Lutein A β-Carotene α-Carotene View All	Blood serum	Column (inner diameter: 250 mm x 4.6 mm, particle size: 5 µm)	-	-

Equipment Used

SFC Instrument, Waters, Milford, MA, USA

MS Instrument, Xevo TQ, Waters

Conditions

Instrument

Modifier: methanol with 0.1% (w/v) ammonium formate; back-pressure: 10 MPa; column temperature: 35 °C; flow rate: 3 mL/min

polarity: positive; capillary voltage: 2.5 kV; cone voltage: 30 V; collision energy: 15 V; desolvation temperature: 600 °C; desolvation gas: 800 L/h; cone gas: 60 L/h

Instructions

Collection of serum samples

1. Collect serum samples from subjects.
2. Purify low-density lipoprotein (LDL) from serum.

Process of extraction of carotenoids

1. Extract the carotenoids from the collected serum by using the following procedure.
2. Add 0.1 mL of water, 0.2 mL of ethanol (including 10 ng/mL echinenone as an internal standard) and 1 mL of heptane with 5 mg/mL dibutylhydroxytoluene to 0.1 mL of the serum and LDL (2.5 mg protein/mL) samples.
3. Subsequently, allow the heptane layer to dry using nitrogen.
4. Dissolve the residue in hexane and subsequently subject to SFC/MS/MS.

Supercritical fluid chromatography (SFC)/MS/MS

1. Analyze the sample/standard using SFC/MS/MS.
2. Use Merck Purospher RP-18e column maintained at 35 °C for analysis.
3. Use methanol as modifier with 0.1% (w/v) ammonium formate 10 - 25% for 15 min, 25% for 2 min, 25 - 10% for 1 min and 10% for 2 min.
4. Set the back-pressure as 10 MPa.
5. Set the flow rate at 3 mL/min.
6. Set the sample volume as 0.1 mL.
7. Operate in electrospray ionization (ESI) mode.
8. For MRM analysis, set the conditions as follows:- polarity: positive, capillary voltage: 2.5 kV, cone voltage: 30 V, collision energy: 15 V, desolvation temperature: 600 °C, desolvation gas: 800 L/h and cone gas: 60 L/h.

CAS Analytical Methods

レコード例

タイトル

物質情報

分析カテゴリー
分析手法名

使用機器、条件

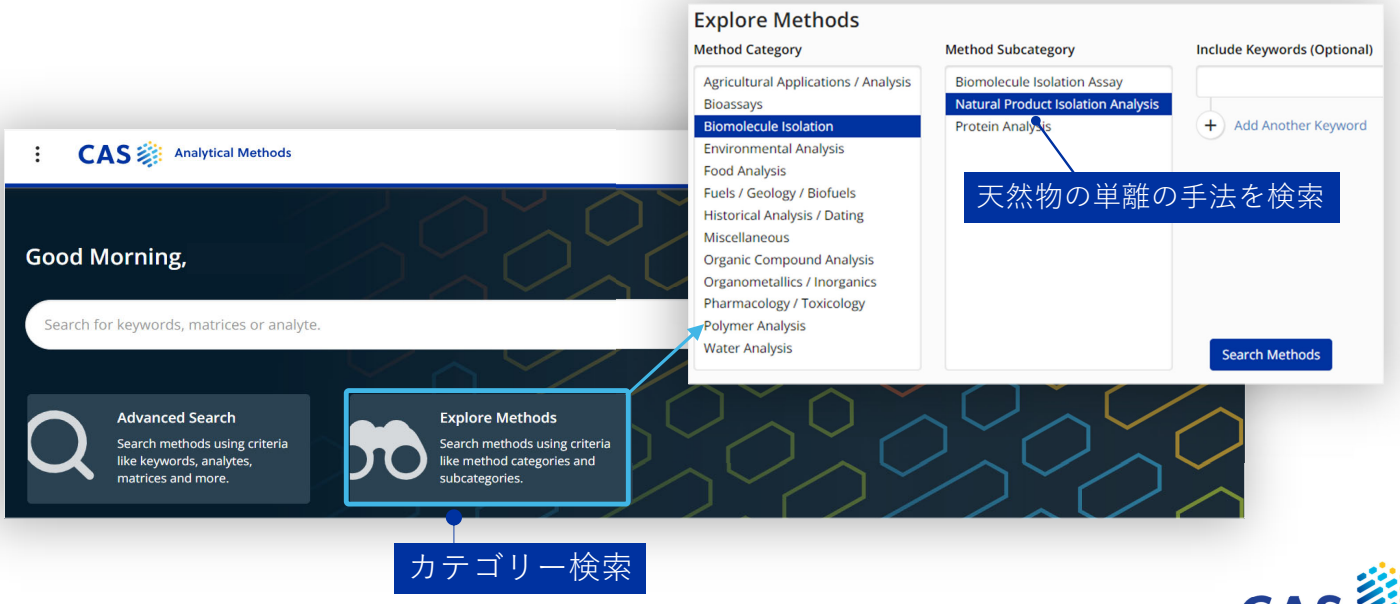
分析手順

バリデーション
（妥当性の検証結果）

収録源
（雑誌名，著者名、
出典のタイトル、抄録など）

デモンストレーション

蜂蜜 (honey) からグルコースを単離する分析手法を検索する



CAS FORMULUS

CAS Formulus

製剤・配合・成分情報を効率的に検索

重点分野：

- 医薬品、農薬、化粧品

一部収録分野：

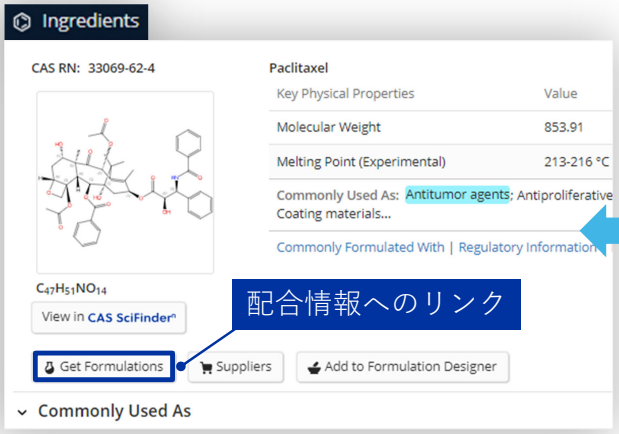
- コーティング剤、日用品、食品、材料

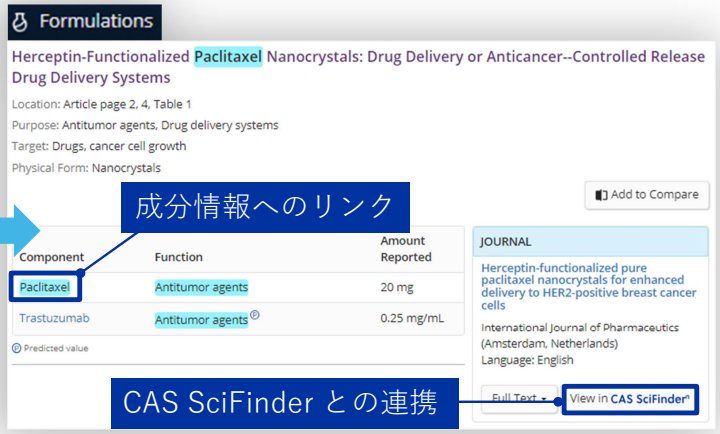
内容収録：

- 配合の構成成分や機能、形状、各成分の価格情報や規制情報

文献および医薬添付文書から製剤・配合の情報を抽出し、
項目ごとに整理してデータベース化

CAS Formulus





成分検索

- 物質名や機能性のキーワードから検索
- 物性、配合中の用途、配合情報へのリンク
- CAS SciFinder の物質詳細へのリンク

配合検索

- 配合成分や用途、ターゲット等から検索
- 成分や機能など配合の詳細、成分情報へのリンク
- CAS SciFinder の出典文献へのリンク

デモンストレーション

抗がん性 (anticancer) の機能を持つ成分を検索し、その配合情報を検索する